秩序無秩序系の二体相関関数について

AUTHOR(S):

西川, 恭治

秩序無秩序系の二体相関関数について

西　川　恭　治（京大理）

（8月17日受理）

§1　序

秩序無秩序系の二体相関関数 $\xi(R)$ が転移点近傍でどのように振舞うかは、臨界散乱の問題等と関連して興味ある問題である。Fisherによると、[1]古典的理論が予言するOrnstein–Zernike型（3次元）

$$\xi(R) = A\, e^{-\kappa R}/R \tag{1a}$$

$$A = \text{Const.}, \qquad \kappa(T) \propto (T - T_c)^{1/2} \tag{1b}$$

は、転位温度T_c の近くでは最早正しくない。Fisherは

$$\xi(R) \sim A e^{-\kappa R}/R^{1+\eta} \tag{2a}$$

$$A = \text{Const.}, \qquad \kappa(T) \propto (T - T_c)^{\nu} \tag{2b}$$

という形を仮定し、2次元Ising modelに対する厳密解やPadé 近似の結果等を総合して3次元系に対するηとνの値の推定を試みてみる。それによると、3次元系では2次元系よりも古典論の予言がかなりよい事が期待される。この論文では、少し立場を変えて、二体相関関数の形を緩和過程の現象論に基いて推定する事を試みる。この方法の特徴は、非線形効果が比較的簡単に調べられる点にある。

§2 ではまず文献 2) §5 で述べた分子場近似での対相関の緩和方程式をもとにして考察する。それによると、T_c の近くでは非線形効果がきいてきてOrnstein–Zernike型からのズレが生ずるが、そのズレは比較的小さく、又(2)の形では表わせない。又、帯磁率への影響は、僅かながら異常性を弱める方向に働き、期待される傾向[1]に反する。

ところで、$\xi(\underset{m}{R})$ のR依存性に関する限り、分子場近似でえられる結果は、より一般的な考察からも導かれる事が示せる。但しこの場合、種々の係数の温度依存性は分子場近似の場合と異つてさし支えない。§3 ではこのような考え方に立つて§2 の結果を一般化し、係数の温度依存性を適当に調節して帯磁率や自発磁化の期待される結果と矛盾なく合わす事ができる事を示す。

最後に§4 では、えられた結果のまとめと、問題点の指摘を行う。

以下の議論では、特に断らぬ限り、系の次元は3次元とし、温度はT_C 以上とする。

§2 分子場近似

議論を簡単にするために、文献 2)で扱つたモデル、即ちNケのスピン（大きさ $1/2$ ）から成る系で、各スピンが熱浴との相互作用で向きを変える場合を考える事にする。

基礎方程式は、文献 2) (33) 式 *)

$$\frac{d\xi(\underset{m}{R})}{dt} = \theta\{\sinh\left[\frac{K}{z}\sum_{\underset{m}{\delta}}\xi(\underset{m}{R}+\underset{m}{\delta})\right]$$

$$-2\xi(R)\cosh\left[\frac{K}{z}\sum_{\delta}\xi(R+\delta)\right]\} \tag{3}$$

である。ここに θ は定数、δ は最近接格子点への変位ベクトル、z は配位数、Kは、J を最近接相互作用の大きさとして、

$$K = 2zJ / k_B T$$

で与えられる。二体相関関数 $\xi(R)$ は、距離Rだけ離れた上向きスピンの対の数を $Ny(R)$ として

$$\xi(R) \equiv \frac{y(R)}{x} - \frac{1}{2} \tag{4}$$

---

*) 文献 2)では Σ_δ の前に $1/z$が落ちている。そのため例えば、(37) 式右辺に $1/\sqrt{z}$ が余計にかかつている。

で定義される。但し上向きスピンの数をN_x とした。今の場合（$T > T_c$）$x = 1/2$ である。(3)式は

$$\xi(R) + \frac{1}{2} = x(R) \tag{5}$$

を局所的上向きスピンの数と見なして、

$$\frac{dx(R)}{dt} = \theta \{ [1 - x(R)] \exp[\Delta E(R)/2k_B T] - x(R) \exp[-\Delta E(R)/2k_B T] \} \tag{6}$$

という方程式から導かれる。但し $\Delta E(R)$ は、場所Rにあるスピンが上向きの時と下向きの時のエネルギー差で、(3)では分子場近似を使つて

$$\Delta E(R) = 2J \sum_{\delta} [2x(R+\delta) - 1] = 4J \sum_{\delta} \xi(R+\delta) \tag{7}$$

とした。

我々が興味あるのは(3)の定常解である。ξ に関する線形近似では、この定常解をきめる式は

$$(2-K)\,\xi(R) = \frac{K}{z} \sum_{\delta} [\xi(R+\delta) - \xi(R)] \simeq \frac{K}{6} \delta^2 \Delta \xi(R) \quad (R \gg \delta) \tag{8}$$

となり、その球対称な解は古典論の結果(1)と一致する。但し

$$\kappa(T) = \sqrt{\frac{6}{K}(2-K)}\ \frac{1}{\delta} \simeq \frac{\sqrt{6}}{\delta}\sqrt{\frac{T-T_c}{T_c}} \tag{9}$$

で、Aはこの限りではきまらない。

ところで、この線形近似は、$\kappa R \gg 1$ ではconsistent になつているが、$\kappa R \lesssim 1$となると最早正しくない。実際この場合は、(8)の両辺は

$$\kappa^2 \delta^2 e^{-\kappa R}/R$$

の程度となり、(8)で無視したξ^3の項と同程度になる。一方T_cの近くでは$\kappa \to 0$となるので、$\kappa R \lesssim 1$なる十分広いRの領域が存在する。かくしてT_cの近くでは、古典論は最早正しくなく、非線形効果までとり入れた$\xi(R)$の振舞いを調べる事が重要になる。

そのために(3)式に立ちもどつて考えてみよう。まずξについての非線形項は3次から始まる事が直ちに分る。そこでまずξ^3まで残してそれ以上を無視する範囲で考える。又、$\delta^2 \Delta \xi$はξに比べて$(\delta/R)^2$の程度に小さいので、ξ^3の項では勾配は無視してさし支えない。すると(3)の定常解をきめる式は

$$\frac{d^2 \xi}{dR^2} + \frac{2}{R}\frac{d\xi}{dR} = \kappa^2 \xi + \frac{8}{\delta^2}\xi^3, \quad (K \simeq 2) \tag{10}$$

となる。但し$\xi(R)$はRのみの関数とした。この方程式はEmden 型[3]と云われる微分方程式の一種だが、その解は、私の知る限りでは、求められていない。

今特に$\kappa R \ll 1$とすると、一つの漸近解として次の形の解が求まる。

$$\xi(R) = \frac{\delta}{4R}\left[\ln\frac{R}{a}\right]^{-1/2} \tag{11}$$

ここにaは任意常数で、(11) は

$$1 \ll \ln\frac{R}{a} \ll (\kappa R)^{-2}$$

という場合の漸近解である。この解は確かに高次の非線形項を無視した近似とconsistent になつているという事を注意しておこう。

さて、(11) 式は、$\kappa R \ll 1$における(1)式に非常に似た形をしているが、それからのズレはFisherの予想しているような(2)式では表わせない形をしている。又、(11) が$\kappa R \sim 1$で(1)に連続的につながるとすると、(1a) の係数Aは

$$A \sim \frac{\delta}{4}\left[-\ln \kappa a\right]^{-1/2} \tag{12}$$

となり、これは最早常数でなく、温度の関数として

$$A(T) \propto \left\{ \ln \frac{T_c}{T-T_c} \right\}^{-\frac{1}{2}} \tag{13}$$

という異常性を示す。これもFisherの予想とは反するものである。

最後に、以上の結果が帯磁率に及ぼす影響を調べてみよう。帯磁率は$T>T_c$では

$$\chi=\int_a^{\infty} dR\, R^2\, \xi(R) \tag{14}$$

に比例する。右辺の積分を$a<R<\kappa^{-1}$の部分と$\kappa^{-1}<R<\infty$ の部分と分けて、夫々に (11) 及び(1)を代入して計算すると

$$\begin{aligned}
\int_a^{\kappa^{-1}} dR\, R^2\, \xi(R) &= \frac{\delta}{4} \int_a^{\kappa^{-1}} \frac{R}{\sqrt{\ln R/a}} \\
&= \frac{a^2\,\delta}{4} \int_0^{\sqrt{-2\ln \kappa a}} e^{t^2}\, dt \\
&\sim \frac{1}{\kappa^2 \sqrt{-\ln \kappa a}} \propto \frac{\left\{ \ln \frac{T_c}{T-T_c} \right\}^{-\frac{1}{2}}}{(T-T_c)}
\end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\kappa^{-1}}^{\infty} dR\, R^2\, \xi(R) &= A \int_{\kappa^{-1}}^{\infty} dR\, R\, e^{-\kappa R} \\
&\sim \frac{A}{\kappa^2} \propto \frac{\left\{ \ln \frac{T_c}{T-T_c} \right\}^{-\frac{1}{2}}}{(T-T_c)}
\end{aligned} \tag{16}$$

がえられる。(15)、(16) を (14) に代入すると、結局帯磁率は、古典的理論の結果と殆ど同じだが、その異常性の度合は多少弱められている事が分る。これは期待される傾向[1)]とは相反するものである。

§3　一般化

§2 の結果は、特殊なモデルに対する特殊な近似の下で導かれたものだが、実は、$\xi(R)$のR依存性に関する限り、(1)及び (11) の形はもつと一般的な考察からも導く事ができる。

それを示すために、まず(3)式の次の三つの性質に着目しよう。

i)　$d\xi(R)/dt$ は、Rの近くでのξの値を通してのみRによつている。

ii)　$d\xi/dt$ は、ξ の奇関数である。

iii)　$d\xi/dt$ は、ξ の巾に展開可能である。

この三つの性質は、実はモデルの取り方や分子場近似という事に関係ない、もつと一般的な性質と考える事ができる。

即ち、まず第一の性質は、一種の局所平衡の帰結に他ならない。これは、R の大きい所で、critical slowing-down が起つてさえいれば、T_cの近くでは極めて一般的に成り立つと思われる。

次に第二の性質は、スピンの上向き状態と下向き状態との間の対称性から来ているものである。即ち、(4)式の y(**R**)は、何も上向きスピン同志の対の数と見なさず、上向きスピンと下向きスピンの対の数と見なしてもよい。その時には ξ(**R**) は符号を変えるだけで大きさは変らない。しかも、局所平衡の下では、対称性から両者は全く同型の緩和方程式に従う筈である。*) 従つてその緩和方程式は ξ の符号の逆転に対して不変でなければならない、即ち $d\xi/dt$ は ξ の奇関数である。

最後に第三の性質についてはいろいろ批判があるかもしれないが、私はこれは極めて自然な性質であると思う。

以上三つの性質だけを使つて(3)式を一般化すると次の形に書かれるであろう。**)

$$\frac{d\xi(\mathbf{R})}{dt} = \Big\{ \sum_{\mathbf{r}} B_1(\mathbf{r})\,\xi(\mathbf{R}-\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{r}}\sum_{\mathbf{r}'}\sum_{\mathbf{r}''} B_2(\mathbf{r},\mathbf{r}',\mathbf{r}'')\,\xi(\mathbf{R}-\mathbf{r})\,\xi(\mathbf{R}-\mathbf{r}')\,\xi(\mathbf{R}-\mathbf{r}'') + \cdots\cdots \Big\} \tag{17}$$

ここに係数 B_1 , B_2 , ……はいずれも $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$, ……の小さい所のみ零でない値をもつ。

---

*) これは長距離秩序度がある場合 ($x \neq 1/2$)でもよい。要は、例えば、上向きスピンが ξ(**R**) だけ過剰にある時に上向きスピンが増す速さと、下向きスピンが同じだけ過剰にある時に下向きスピンが増す速さとが同じだという事である。

**) 但しこれは、主な緩和過程が長距離秩序度の変化を通して起つている場合で、強磁性転移や格子気体の場合のように、主な緩和過程が拡散による場合には、(17) の右辺全体に Δ（ラプラシアン）がかかつた形になる。

さて、まず (17) の展開が3次までで打ち切つてよい場合を考えよう。この時には、Rの大きい所での $\xi(\mathbf{R})$ の定常解をきめる式は、前章と同様の考察から

$$b_1\xi(\mathbf{R}) + D\Delta\xi(\mathbf{R}) + b_2\xi^3(\mathbf{R}) = 0 \tag{18}$$

と書かれる。ここに

$$b_n \equiv \sum_{\mathbf{r}}\cdots\sum_{\mathbf{r}'} B_n(\mathbf{r},\cdots,\mathbf{r}') \qquad (n=1,2,\cdots) \tag{19}$$

$$D = \frac{1}{3!}\sum_{\mathbf{r}} r^2 B_1(\mathbf{r}) \tag{20}$$

(18) 式は (10) 式とく同型であるから、その球対称な漸近解は

$$\xi(R)\begin{cases} = Ae^{-\kappa R}/R & (\kappa R \gg 1) \qquad (21) \\ = -\dfrac{D}{2b_2}\sqrt{\dfrac{1}{R\sqrt{\ln R/a}}} & \left(1 \ll \ln\dfrac{R}{a} \ll (\kappa R)^{-2}\right) \qquad (22) \end{cases}$$

と求められる。但し

$$\kappa = \sqrt{-b_1/D} \tag{23}$$

で、又Aは、(21)、(22) が $\kappa R \sim 1$ で連続的につながるとすると

$$A \simeq \sqrt{-\frac{D}{2b_2}}\{-\ln\kappa a\}^{-1/2} \tag{24}$$

で与えられる。一方、帯磁率に対するR＞aからの寄与は、前と同様の計算で

$$\chi \sim \sqrt{-\frac{D}{b_2}}\,\frac{D}{b_1}\{-\ln\kappa a\}^{-1/2} \tag{25}$$

となる。

(21)～(25) は、対応する前章の結果と同型であり、唯違いは、係数 b_1, b_2 a等の温度依存性が不問にふしてあるという点だけである。

ところで、前にも述べたように、(17) は一般に長距離秩序度がある時でも成り立つ。このような時には、$\xi(\mathbf{R})$ は、長距離秩序度の部分 σ と変動部分 $\xi'(\mathbf{R})$ とに分けて考える事ができる。

$$\xi(\mathbf{R}) = \sigma + \xi'(\mathbf{R}) \tag{26}$$

$$\sigma \equiv \frac{1}{V}\int d\mathbf{R}\ \xi(\mathbf{R}) \tag{27}$$

（Vは体積）。今、変動量は有限なrange しか持たないと考えられるから

$$\lim_{V\to\infty} \frac{1}{V}\int d\mathbf{R}\ [\xi'(\mathbf{R})]^n = 0 . \qquad (n \geq 1)$$

するとσの方程式は次のようになる。

$$\frac{d\sigma}{dt} = b_1\ \sigma + b_2\ \sigma^3 + \cdots\cdots \tag{28}$$

但し、(17) の主な緩和過程は長距離秩序度の変化によるとした。今、(28) の安定な定常解が自発磁化を与えるとすると、3次まで打ち切る近似で、T_cの直下での自発磁化は

$$\sigma \simeq \sqrt{-b_1 / b_2} \tag{29}$$

となる。

そこで最後に、

$$b_n \propto (T-T_c)^{\beta_n} \qquad (\beta_n \geq 0) \tag{30}$$

という温度依存性を仮定して、我々の近似のconsistencyを検討し、あわせて帯磁率と自発磁化の温度依存性を考察してみよう。

まず (29) が正しいためには

$$\beta_2 < \beta_n + (n-2)(\beta_1 - \beta_2) \qquad (n=3,\ 4,\cdots) \tag{31}$$

であればよい。これは

$$\beta_1 - 2\beta_2 > 0 \tag{32}$$

であれば自動的に満されている。

一方 (18) 式は、$\beta_2 > 0$である限り、明らかにRの小さい所ではみたされない。今、Rの小さい所（或は$T \to T_c$の極限）では

$$D\Delta\xi(R) + b_n\xi^{2n-1}(R) = 0 \qquad (\beta_n=0,\ n\geqq 3)\cdots \tag{33}$$

が成り立つているとすると、そこでは

$$\xi(R) \sim (\delta/R)^{\frac{1}{n-1}} \tag{34}$$

となり、従つて (18) が成り立つようなRの下限、即ちaは

$$\left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{\beta_2} \sim \left(\frac{\delta}{a}\right)^{\frac{2n-4}{2n-1}} \tag{35}$$

できまつて来る。(34)，(35)を使つてR<a からの帯磁率への寄与を計算してみると

$$\int^a dR R^{2-\frac{1}{n-1}} \sim (T-T_c)^{-\frac{3n-4}{2n-4}\beta_2} \tag{36}$$

となる。これが (25) に比べて無視できるためには

$$\frac{3n-4}{2n-4}\beta_2 < \beta_1 + \frac{\beta_2}{2} \tag{37}$$

で、これも (32) がみたされていれば自動的に成り立つ。

以上から、(32) の条件は、ξについての3次以上を無視する我々の近似が consistent であるための充分条件である事が分る。そしてこの条件の下で、は自発磁化及び帯化率の温度依存性は

$$\sigma \sim (T-T_c)^{\frac{\beta_1-\beta_2}{2}} \tag{38}$$

$$\chi \sim (T-T_c)^{-(\beta_1+\frac{\beta_2}{2})}\left\{\ln\frac{T_c}{T-T_c}\right\}^{-\frac{1}{2}} \tag{39}$$

で与えられる。今特に

$$\beta_1 = \frac{10}{9}, \qquad \beta_2 = \frac{4}{9}$$

とおけば、(38),(39) は、最後の対数依存性を除いて、期待される結果[1]

$$\sigma \propto (T - T_C)^{1/3}$$

$$\chi \propto (T - T_C)^{-4/3}$$

を与える事を附言しておく。

§4 まとめ

緩和過程の現象論にもとずいて、二体相関関数の転位点近傍における漸近的的振舞いを調べてみた。基本的な仮定は、長距離相関に対する局所平衡の仮定と、(4)で定義される $\xi(R)$ についての巾展開が可能だという仮定である。

その結果、転移点の近くでは、ξ についての非線形効果がきいて来て、古典的理論の予言するOrnstein-Zemike 型からのズレが生ずる事が分つた。非線形項を3次までで切る近似で、適当な漸近形を求めると、それは、Fisherの予想した(2)の形とは次の二点で異つたものとなる。

i) $\kappa R < 1$ の領域でRに対する対数的依存性が現われる。

ii) 係数AがT_C の近くで異常性を示す。こうして求まつた $\xi(R)$ の漸近形を使つて帯磁率を計算すると、分子場近似では、古典的理論の結果と殆ど変らないが、多少異常性が弱められる結果になる。一般の近似では、係数の温度依存性を適当に調節する事によつて、帯磁率と自発磁化に対する期待される結果と矛盾なく合わせる事ができる。我々の結果は、同じく非線形効果を別の角度から調べたM. S. Green[4] の結果と比べられるが、彼の方法では近似の性格が必ずしも明瞭でなく、しかもその解き方は、粒子とhole (上向きスピンと下向きスピン) の対称性を無視している。

我々の方法で非線形効果が割合スムーズに調べられたのは、多分に3次元の特殊性によつている。実際4次元又はそれ以上では、ξ^3 まで残して $\kappa^2\xi$ を無視する近似では適当な漸近解が求まらず、むしろ線形近似で $\kappa R \ll 1$ として求まる。

$$\xi(R) \sim \frac{1}{R^{d-2}} \qquad (d\text{は次元数})$$

の方が非線形項を無視する近似ともconsistent になつていて尤もらしい。

一方2次元では、確かに非線形項が重要になるが、ξ^3までで切つた近似では

$$\xi(R) = \sqrt{-\frac{D}{b_2}}\ \frac{1}{R}$$

という特解しか求まらず、これを強引に3次元の場合と同じように扱つて、二次元Ising modelに対する厳密解

$$\sigma \propto (T-T_C)^{1/8}$$

$$\chi \propto (T-T_C)^{-7/4}$$

と合わせようとすると

$$\beta_1 = \frac{15}{8}\ , \qquad \beta_2 = \frac{13}{8}$$

が要求される。これは(32)の条件をみたしていないので、必ずしもconsistent であるとは云えない。

我々の方法では、又、比熱の異常性を調べる事ができない。又、自発磁化と帯磁率との関係しても、強磁性転移のように、自発磁化をきめる緩和過程（双極子相互作用又はスピン格子相互作用）と帯磁率をきめる緩和過程（交換相互作用）とが異る時には明らかでない。このように、我々の理論は多くの問題点を含んではいるが、3次元の場合の非線形効果の重要性と、それを調べる足がかりを示す点で何らかの役に立てばと思う。

終りに、いろいろ貴重な御討論をいただいた富田先生、松原先生及び教育大高野先生に深く感謝いたします。

文　　献

1) M. E. Fisher, J. Math. Phys. 5 (1964), 944.
2) 西川恭治、物性研究 1.4 (1965), 14.
3) H. T. Davis, Introduction to Nonlinear Differential and Integral Equations (Dover Publication, Inc. N. Y., 1962)

4) M. S. Green, J. Chem. Phys. 33 (1960), 1403.